

рис.2 Зависимость формы петель диэлектрического гистерезиса (а),  $P_s$ ,  $P_r$ ,  $E_c$  (б) ТР состава  $(1-x-y) \text{NaNbO}_3 - x \text{KNbO}_3 - y \text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$  ( $x=0.30$ ,  $y=0.15$ ) от температуры

Полученные результаты целесообразно использовать при разработке соответствующих устройств электронной техники.

Работа выполнена в рамках темы: «Экологически чистые материалы для инновационных multifunctional систем: от цифрового дизайна к производственным технологиям». (Открытый конкурс исследовательских лабораторий ЮФУ-2020)

Список публикаций:

[1] Andryushin K.P., *Sodium solutions of sodium- potassium-cadmium. Preparation, structure, electrophysical and thermofrequency properties* / K.P. Andryushin, I.N. Andryushina, L.A. Reznichenko // LAP LAMBERT Academic Publishing. 2012. 61 p. (Монография). ISBN 978-3-8454-0867-5. <https://www.lap-publishing.com/catalog/details/store/gb/book/978-3-8454-0867-5/solid-solutions-of-sodium-potassium-cadmium-niobats?search=Preparation,%20structure>

## Расчет спектра комбинационного рассеяния силиценовых нанолент

Мукунов Никита Янович

Северо-Восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова

Шарин Егор Петрович, к.ф.-м.н.

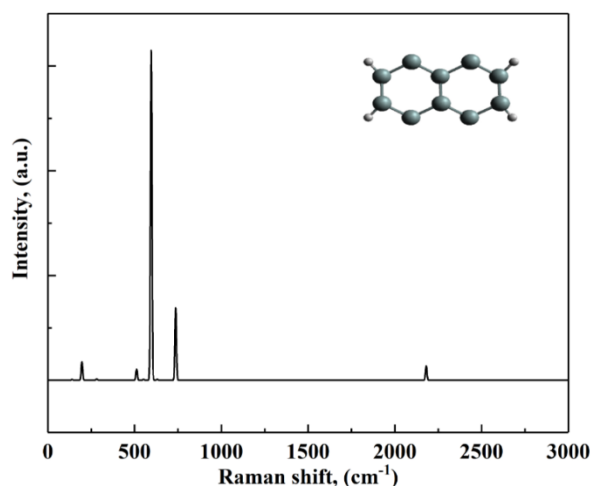
[muksunov97@mail.ru](mailto:muksunov97@mail.ru)

В последнее время двумерные материалы вызвали большой интерес благодаря их уникальным свойствам. Так, например, недавно был теоретически предсказан и синтезирован экспериментально силицен.

Исследования силиценовых нанолент (SiNR) с помощью сканирующей зондовой микроскопии и спектроскопии подтвердили тесную связь между структурой и свойствами, предоставляя структурную и электронную информацию в атомном масштабе.

В данной работе на основе метода функционала плотности произведен расчет колебательного спектра силиценовых нанолент. Края которых пассивированы атомами водорода. В качестве инструмента *ab initio* расчетов использовался программный комплекс Quantum Espresso [1], предназначенный для моделирования атомно-молекулярных и электронно-ядерных систем методами квантовой механики и молекулярной динамики. Взаимодействие между ионами и электронами моделируемой системы описывается посредством псевдопотенциального подхода и метода присоединенных плоских волн. *Ab initio* моделирование проводилось в рамках теории функционала плотности с использованием приближения локальной плотности (LDA). Для ускорения сходимости в расчетах выбрана величина энергии «обрезания»  $E_{cut}=60 \text{ Ry}$  подобно расчетной процедуре, изложенной в работе [2]. Разбиение обратного пространства на сетку  $6 \times 6 \times 1$  осуществлялось посредством использования метода Монхорста-Пака [3]. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным  $20 \text{ \AA}$ .

В работе рассчитаны Raman – спектры трех силиценовых нанолент с краями типа «кресло» пассивированными атомами водорода с шириной  $N=3$ ,  $N=5$  и  $N=7$  (3-ASiNR, 5-ASiNR, 7-ASiNR) соответственно. На рис.1 показан Raman - спектр силиценовой наноленты с краями типа «кресло» шириной  $N=3$  (3-ASiNR)



Из рисунка видно, в наноленте 3-ASiNR характерные сигнатуры подобные для однослойного графена в спектре комбинационного рассеяния все еще хорошо сохраняются.

Список публикаций:

[1] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et. al., *J. Phys.: Condens. Matter* 21, 1-19 (2009).

[2] S. Lebegue *Phys. Rev. B* 79, 115409-115412 (2009).

[3] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, *Phys. Rev. B* 13, 5188–5192 (1976).

## Создание поверхностных наноструктур оксида цинка при обработке пластин металла горячей водой

**Парфенов Андрей Вадимович**

*Кузнецов Дмитрий Константинович, Шур Владимир Яковлевич*

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина*

[parfenov132010@mail.ru](mailto:parfenov132010@mail.ru)

Оксид цинка (ZnO) привлекает значительное внимание как научных кругов, так и промышленности благодаря своим уникальным физическим и химическим свойствам. Это полупроводниковый материал с шириной запрещенной зоны 3.4 эВ и энергией связи экситонов 60 мэВ при комнатной температуре. Кроме того, ZnO является уникальным материалом с точки зрения возможности формирования наноструктур с различной морфологией: наностержни, нановолокна, нанопластины и др. [1] Все эти свойства делают его перспективным материалом для широкого спектра технологических применений. В том числе для изготовления электронных, фотонных и оптических устройств, таких как солнечные батареи, датчики, ультрафиолетовые фотоприемники, лазеры и полевые транзисторы [1,2].

Изучалось формирование поверхностных наноструктур оксида цинка при обработке поверхности цинковых пластин горячей водой.

Использовались пластины цинка толщиной 0,5 мм и размером 10 мм в диаметре. Непосредственно перед обработкой горячей водой исходный слой оксида цинка и органические загрязнения удалялись мелкодисперсной наждачной бумагой. После чего образец очищался ультразвуком в ацетоне и изопропиловом спирте в течение 5 минут.

Обработку горячей деионизованной водой проводили при температуре 60-95 ° С в течение 30 мин. Объем воды составлял 50 мл. После обработки образцы высушивались потоком воздуха.

Смачиваемость обработанных поверхностей характеризовалась углом смачивания капли воды, измеренного методом лежащей капли. Измерения проводились после тщательной сушки образца сжатым воздухом. Каплю воды объемом 2 мкл помещали на поверхность и регистрировали ее профиль с помощью камеры высокого разрешения FASTCAM Mini UX100 (Photron, Германия).

Морфология поверхности пластин визуализировалась методом сканирующей электронной микроскопией (СЭМ) с использованием двухлучевой рабочей станции Auriga CrossBeam (Carl Zeiss, Германия), работающей при ускоряющем напряжении 3 кВ и токе пучка около 100 пА. Был использован режим регистрации вторичных электронов с разрешением до 2 нм.